ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

توصیف شیفت دانسیته الکترونی برهمکنشهای درون مولکولی غیرپیوندی

عنوان انگلیسی مقاله :

Electron density shift description of non-bonding intramolecular interactions

ایران عرضه
مرجع مقالات ترجمه شده

توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، اینجا کلیک نمایید.

ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

5.Conclusions

A new methodology for the study of the EDS in intramolecular interaction based on the molecular fragmentation scheme is de-scribed. The methodology has been tested in an intermolecular HB dimer, where the EDS can be obtained as the difference be-tween the complex and the isolated monomer. The Hodgkin simi-larity index has been used to quantify the similarity between the exact EDS and those obtained by the methodology proposed here. The intramolecular EDS have been calculated for a variety of intra-molecular interactions: hydrogen bonds, chalcogen–chalcogen, N···Br, B···N, dihydrogen and Si···N interactions, and also repul-sive halogen—halogen and hydrogen–hydrogen contacts, providing a qualitative description in all the cases. Based on this study the following rules for the fragmentation scheme are recommended:(1) select the highest order of fragmentation possible, (2) do not chose that order in which the HH^n fragment corresponds to the H_2 molecule, (3) only fragmentations which involve the rupture of single bond are allowed.

5. نتیجه گیری

در این مقاله متدولوژی جدیدی برای مطالعه EDS (شیفت دانسیته الکترونی) در برهمکنشهای درون مولکولی بر مبنای طرح تفکیک مولکولی مطرح شده است. این متدولوژی در یک دیمر با پیوند هیدروژنی یا یک پیوند دی هیدروژنی درون مولکولی مورد آزمایش قرار گرفته و در آن EDS بصورت اختلاف EDS کمپلکس و منومرهای سازنده محاسبه گردیده است. شاخصی بنام شاخص شباهت Hodgkin برای کمّی سازی شباهت بین یک EDS واقعی و EDSهایی که از طریق متدولوژی مورد نظر محاسبه شده اند، بکار رفته است. EDS درون مولکولی برای تعدادی از برهمکنشهای درون مولکولی مثل پیوندهای هیدروزنی، برهمکنشهای کالکوژن-کالکوژن ، N...Br، B...N ، دی هیدروژن ، N...Si و نیز پیوندهای هالوژن-هالوژن و هیدروژن-هیدروژن با ارائه توصیفی کیفی در همه موارد، محاسبه شده اند. براساس این مقاله، قوانین زیر برای طرح تفکیک پیشنهاد میشوند: الف) انتخاب بزرگترین درجه تفکیک ممکن. ب) عدم انتخاب مرتبه تفکیک در جزء HH^n که با جزء مولکولی H2 مطابقت دارد. ج) تنها تفکیکهایی که منجر به شکستن پیوند یگانه میشوند مجاز هستند.

ایران عرضه
مرجع مقالات
ترجمه شده

توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، اینجا کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، اینجا کلیک نمایید.